

USO DE SIMULAÇÃO DE DINÂMICA MOLECULAR NA PRODUÇÃO DE ÉSTERES ETÍLICOS PELA ALCOÓLISE DE ÓLEO DE FRANGO RESIDUAL

Gabriel Paixão De Oliveira¹
José Cleiton Sousa Dos Santos²

RESUMO

O uso da simulação molecular computadorizada é uma forma de se automatizar e tornar muito mais precisos processos entre moléculas que antes eram feitos in vitro e, por isso, tomavam massivo tempo de trabalho e possuíam uma acurácia relativa inferior. Possuindo esse contexto em mente, justifica-se o desenvolvimento de softwares capazes de realizar automaticamente tarefas de simulação por meio de técnicas avançadas em computação. Nesse sentido, para a presente pesquisa, foram produzidos vídeos de fins didáticos para que se pudesse explorar e informar as técnicas mais utilizadas na prática in silico desse tipo de simulação. Além disso, artigos também foram redigidos com base num amplo exame de literatura. Por fim, foram identificadas diversas dificuldades de pesquisa nesse campo, tendo em vista o material precário e de detalhes muito reduzidos para consulta. Apreende-se, portanto, que há muito mais a se pesquisar e se aprofundar para atender categoricamente aos objetivos do trabalho.

Palavras-chave: Biolubrificantes; Docagem molecular; Dinâmica molecular; Bioquímica computacional.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Ceará, Discente, gabrielpaixao@aluno.unilab.edu.br¹
Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Ceará, Docente, jcs@unilab.edu.br²

INTRODUÇÃO

Tendo em vista que os primeiros métodos de encaixe molecular eram feitos mecanicamente, numa demora inconveniente para a sequência da pesquisa científica, meios computadorizados surgiram para automatizar e reduzir o tempo de resultado dessas simulações. Sob tal perspectiva, esses modernos recursos entrelaçam-se às áreas de bioquímica e computação e são de extrema importância para análises mais contundentes nas investigações desse campo. Além disso, por se tratarem de ferramentas relativamente novas, necessitam de mais estudos e produções acadêmicas para serem plenamente conhecidas e acuradamente exploradas.

Desse modo, técnicas e softwares são utilizados em busca das experiências *in silico* mais realistas disponíveis, tornando-se gradativamente aliados na produção e pesquisa de alternativas ecológicas ao combustível comum. Destaca-se, assim, o processo de desenvolvimento de biolubrificantes, capaz de em muito se beneficiar do sistemático ensaio promovido pelas simulações moleculares computacionais.

Nesse sentido, foram dados importantes passos para esse estudo, principalmente a partir das experiências adquiridas com cada ferramenta de software utilizada durante o período deste trabalho.

METODOLOGIA

Dois tutoriais em vídeo foram publicados no site YouTube.com acerca das etapas necessárias para a realização de uma docagem molecular genérica, a fim de que pudessem ser utilizados pelos outros participantes do grupo de pesquisa como ponto de partida para iniciarem no estudo desse assunto. Os dispositivos computacionais necessários para a realização dessa atividade foram: para a captura de tela, Open Broadcaster Software®; para o desenho de estruturas químicas, Chem3D 16.0; para a visualização das moléculas, BIOVIA Discovery Studio Visualizer; para os cálculos de ligação das moléculas, UCSF Chimera 1.15 e AutoDock Vina; para a edição audiovisual, Wondershare Filmora 9.

Além disso, os artigos produzidos “Taguchi design-assisted co-immobilization of lipase A and B from *Candida antarctica* onto chitosan: Characterization, kinetic resolution application, and docking studies” e “A Comprehensive Review on the Use of Metal-Organic Frameworks (MOFs) Coupled with Enzymes as Biosensors” foram escritos a partir de uma vasta revisão bibliográfica dos assuntos tratados.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Vídeo “Introdução - Ferramentas importantes para o docking molecular” publicado no YouTube (<https://youtu.be/TLNiBGxIOBI>).

Vídeo “Como fazer um docking molecular” transmitido no YouTube (<https://youtu.be/w2cVGoKooHs>).

Os tutoriais tiveram mais de sessenta visualizações ao todo.

As colaborações feitas em cada artigo foram realizadas por meio da revisão bibliográfica de vários outros textos.

O aperfeiçoamento do manuseio de cada software empregado no trabalho também muito deve ser levado em consideração.

Foi também revisado o artigo “Taguchi design-assisted co-immobilization of lipase A and B from *Candida antarctica* onto chitosan: Characterization, kinetic resolution application, and docking studies” para que pudesse ser publicado no jornal científico *Chemical Engineering Research and Design*.

Além disso, produziu-se parte do artigo “A Comprehensive Review on the Use of Metal-Organic Frameworks (MOFs) Coupled with Enzymes as Biosensors” depois disponibilizado pela revista *Electrochem*.

CONCLUSÕES

A execução de alguns programas não se deram como o esperado, não tendo sido possível replicar etapas finais do processo de simulação molecular.

Isso se deve principalmente à omissão de detalhamentos dos procedimentos empregados na maioria dos textos acadêmicos estudados.

Além disso, quando se tentou apreendê-los por meios alternativos na internet, foram encontrados materiais muito fragmentados e contendo contradições entre si.

Ainda nesse contexto, as atualizações de alguns programas também dificultaram o andamento das investigações, tendo em vista que apresentaram recursos diferentes dos pesquisados em tutoriais.

Sendo assim, mesmo com todas essas dificuldades, o mais desafiador foi lidar com tarefas que não são especificamente exercitadas ou são pouco exploradas ao longo do curso de Engenharia de Computação, forçando o aluno a ir bem mais adiante em busca do conhecimento necessário para a pesquisa.

Portanto, pode-se dizer que o uso de simulação de dinâmica molecular na produção de ésteres etílicos pela alcoólise de óleo de frango residual deve ser ainda muito aperfeiçoado para que se possa alcançar esse objetivo fim do trabalho.

AGRADECIMENTOS

Agradeço imensamente ao meu professor e orientador que me concedeu a oportunidade de trabalhar nesta pesquisa, à minha família que me apoiou durante esse período, e ao programa institucional de bolsas em iniciação científica UNILAB/CNPq que me conferiu bolsa remunerada por esse tempo.

REFERÊNCIAS

- Abdolalian, P., & Morsali, A. (2019). Flexible and breathing metal - organic framework with high and selective carbon dioxide storage versus nitrogen. *Polyhedron*, 161, 56-62. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2019.01.001>
- Adegoke, K. A., Agboola, O. S., Ogunmodede, J., Araoye, O., & Bello, O. S. (2020). Metal-organic frameworks as adsorbents for sequestering organic pollutants from wastewater. *Materials Chemistry and Physics*, 123246. <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2020.123246>
- Ahmadijokani, F., Mohammadkhani, R., Ahmadipouya, S., Shokrgozar, A., Rezakazemi, M., Molavi, H., Aminabhavi, T. M., & Arjmand, M. (2020). Superior chemical stability of UiO-66 metal-organic frameworks (MOFs) for selective dye adsorption. *Chemical Engineering Journal*, 399(March), 125346. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.125346>
- Alhumaimess, M. S. (2020). Metal-organic frameworks and their catalytic applications. *Journal of Saudi Chemical Society*, 24(6), 461-473. <https://doi.org/10.1016/j.jscs.2020.04.002>
- Ali Akbar Razavi, S., & Morsali, A. (2019). Linker functionalized metal-organic frameworks. *Coordination Chemistry Reviews*, 399, 213023. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2019.213023>
- Ali, N., Bilal, M., Khan, A., Ali, F., Khan, H., Khan, H. A., Rasool, K., & Iqbal, H. M. N. (2020). Understanding the hierarchical assemblies and oil/water separation applications of metal-organic frameworks. *Journal of Molecular Liquids*, 318. <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2020.114273>

- Bazzazzadeh, A., Faraji, B., Kianinejad, N., Nouri, A., & Irani, M. (2020). Fabrication of poly (acrylic acid) grafted#chitosan / polyurethane / magnetic MIL-53 metal organic framework composite core-shell nano fi bers for co- delivery of temozolomide and paclitaxel against glioblastoma cancer cells. *International Journal of Pharmaceutics*, 587(May), 119674. <https://doi.org/10.1016/j.ijpharm.2020.119674>
- Berilyn, P., Chen, H., & Lin, C. (2020). Microporous and Mesoporous Materials De novo synthesis and particle size control of iron metal organic framework for diclofenac drug delivery. *Microporous and Mesoporous Materials*, 309(June), 110495. <https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2020.110495>
- Cai, P., Chen, W., Day, G. S., Drake, H. F., Joseph, E. A., Perry, Z. T., Xiao, Z., & Zhou, H. C. (2019). Metal-organic frameworks: New functional materials and applications. In *Comprehensive Nanoscience and Nanotechnology* (Vols. 1-5, Issue June). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-803581-8.11382-7>
- Ding, S. shuai, He, L., Bian, X. wu, & Tian, G. (2020). Metal-organic frameworks-based nanozymes for combined cancer therapy. *Nano Today*, 35, 100920. <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2020.100920>
- Duo, H., Lu, X., Wang, S., Liang, X., & Guo, Y. (2020). Trends in Analytical Chemistry Preparation and applications of metal-organic framework derived porous carbons as novel adsorbents in sample preparation. *Trends in Analytical Chemistry*, 133, 116093. <https://doi.org/10.1016/j.trac.2020.116093>
- Elsaidi, S. K., Mohamed, M. H., Banerjee, D., & Thallapally, P. K. (2018). Flexibility in Metal - Organic Frameworks : A fundamental understanding. *Coordination Chemistry Reviews*, 358, 125-152. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2017.11.022>
- Esrafilu, L., Tehrani, A. A., Morsali, A., Carlucci, L., & Proserpio, D. M. (2019). Ultrasound and solvothermal synthesis of a new urea-based metal-organic framework as a precursor for fabrication of cadmium(II) oxide nanostructures. *Inorganica Chimica Acta*, 484(Ii), 386-393. <https://doi.org/10.1016/j.ica.2018.09.025>
- Formalik, F., Neimark, A. V., Rogacka, J., Firlej, L., & Kuchta, B. (2020). Journal of Colloid and Interface Science Pore opening and breathing transitions in metal-organic frameworks : Coupling adsorption and deformation. *Journal of Colloid And Interface Science*, 578, 77-88. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2020.05.105>
- Guo, F., Su, C., Fan, Y., Shi, W., & Zhang, X. (2020). Journal of Solid State Chemistry Construction of a dual-response luminescent metal-organic framework with excellent stability for detecting Fe 3 p and antibiotic with high selectivity and sensitivity. *Journal of Solid State Chemistry*, 284(December 2019), 121183. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2020.121183>
- Hao, Y., Kang, Y., Mi, Y., Wang, W., & Lei, Z. (2021). Journal of Colloid and Interface Science Highly ordered micro-meso-macroporous Co-N-doped carbon polyhedrons from bimetal-organic frameworks for rechargeable Zn-air batteries. *Journal of Colloid And Interface Science*, 598, 83-92. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2021.03.142>
- Hwa, J., Jeoung, S., Chung, Y. G., & Ri, H. (2019). Elucidation of flexible metal-organic frameworks: Research progresses and recent developments. *Coordination Chemistry Reviews*, 389, 161-188. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2019.03.008>
- Jeoung, S., Kim, S., Kim, M., & Ri, H. (2020). Pore engineering of metal-organic frameworks with coordinating functionalities. *Coordination Chemistry Reviews*, 420, 213377. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2020.213377>
- Jia, X., Li, S., Sun, T., Wang, Y., Fan, Y., Zhang, C., & Xu, Y. (2021). Single crystal metal - organic framework constructed by vertically self - pillared nanosheets and its derivative for oriented lithium plating. *Chinese Journal of Catalysis*, 42(9), 1553-1560. [https://doi.org/10.1016/S1872-2067\(20\)63755-X](https://doi.org/10.1016/S1872-2067(20)63755-X)
- Jia, Z., Hao, S., Wen, J., Li, S., Peng, W., Huang, R., & Xu, X. (2020). Electrochemical fabrication of

metal-organic frameworks membranes and films: A review. *Microporous and Mesoporous Materials*, 305(March).

<https://doi.org/10.1016/j.micromeso.2020.110322>

Latifi, L., & Sohrabnezhad, S. (2020). Drug delivery by micro and meso metal-organic frameworks. *Polyhedron*, 180, 114321. <https://doi.org/10.1016/j.poly.2019.114321>

Li, B., Wen, H. M., Yu, Y., Cui, Y., Zhou, W., Chen, B., & Qian, G. (2018). Nanospace within metal-organic frameworks for gas storage and separation. *Materials Today Nano*, 2, 21-49. <https://doi.org/10.1016/j.mtnano.2018.09.003>

Li, D., Xu, H. Q., Jiao, L., & Jiang, H. L. (2019). Metal-organic frameworks for catalysis: State of the art, challenges, and opportunities. *EnergyChem*, 1(1), 100005. <https://doi.org/10.1016/j.enchem.2019.100005>

Masoomi, M. Y., Bagheri, M., & Morsali, A. (2017). Porosity and dye adsorption enhancement by ultrasonic synthesized Cd (II) based metal-organic framework. *Ultrasonics - Sonochemistry*, 1i.

<https://doi.org/10.1016/j.ultsonch.2017.01.018>

Mehtab, T., Yasin, G., Arif, M., Shakeel, M., Korai, R. M., Nadeem, M., Muhammad, N., & Lu, X. (2019). Metal-organic frameworks for energy storage devices: Batteries and supercapacitors. *Journal of Energy Storage*, 21(December 2018), 632-646. <https://doi.org/10.1016/j.est.2018.12.025>

Mendes, R. F., & Paz, F. A. A. (2016). Dynamic Breathing Effect in Metal-Organic Frameworks : Reversible 2D-3D-2D-3D Single-Crystal to Single-Crystal Transformation. *Inorganica Chimica Acta*.

<https://doi.org/10.1016/j.ica.2016.09.037>

Meteku, B. E., Huang, J., Zeng, J., Subhan, F., Feng, F., Zhang, Y., Qiu, Z., Aslam, S., Li, G., & Yan, Z. (2020). Magnetic metal-organic framework composites for environmental monitoring and remediation. *Coordination Chemistry Reviews*, 413, 213261. <https://doi.org/10.1016/j.ccr.2020.213261>

Moeinian, M., & Akhbari, K. (2015). How the guest molecules in nanoporous Zn(II) metal-organic framework can prevent agglomeration of ZnO nanoparticles. *Journal of Solid State Chemistry*, 225(Ii), 459-463.

<https://doi.org/10.1016/j.jssc.2015.02.017>

Nasruddin, Zulys, A., Yulia, F., Buhori, A., Muhadzib, N., Ghiyats, M., & Saha, B. B. (2020). Synthesis and characterization of a novel microporous lanthanide based metal-organic framework (MOF) using naphthalenedicarboxylate acid. *Journal of Materials Research and Technology*, 9(4), 7409-7417.

<https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2020.05.015>